

(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号

特開平11-326330

(43)公開日 平成11年(1999)11月26日

(51)Int.Cl.⁶

識別記号

F I

G 0 1 N 33/68

G 0 1 N 33/68

C 0 7 K 1/00

C 0 7 K 1/00

審査請求 未請求 請求項の数4 O L (全 7 頁)

(21)出願番号 特願平10-140834

(22)出願日 平成10年(1998) 5 月22日

(71)出願人 000005108

株式会社日立製作所

東京都千代田区神田駿河台四丁目6番地

(72)発明者 入江 亮太郎

東京都国分寺市東壺ヶ窪一丁目280番地

株式会社日立製作所中央研究所内

(74)代理人 弁理士 小川 勝男

(54)【発明の名称】 蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法

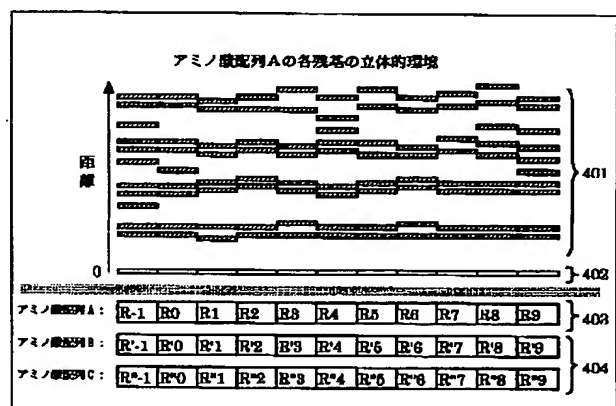
(57)【要約】

【課題】 アミノ酸配列と蛋白質立体構造情報との比較を容易にする表示方法を提供する。

【解決手段】 類似するアミノ酸配列403、404は各矩形内に示すアミノ酸残基の種類を示す記号で表示され、アミノ酸配列A、403を含む立体構造既知の蛋白質の各アミノ酸残基は、横に並ぶ矩形群402で表わされ、同一アミノ酸残基を表現する矩形は対置される。402の各矩形で表現されるアミノ酸残基の立体的環境は、矩形の真上の領域401（アミノ酸配列と並置して各アミノ酸残基の立体的環境を、他のアミノ酸残基の記号を近いものから順に直線上に並べ表示する領域）内の矩形群により表現され、領域401内の各矩形は、真下の402の矩形で表現されるアミノ酸残基以外のアミノ酸残基を表現する。

【効果】 領域401内の矩形群の縦方向での矩形の密度の比較から、アミノ酸配列403の任意アミノ酸残基が、蛋白質中に埋没しているのか、面近傍に存在するのにかに関する情報が得られる。

図4



【特許請求の範囲】

【請求項 1】第 1 方向に、アミノ酸配列の各アミノ酸残基の記号を表示し、前記第 1 方向に表示された前記各アミノ酸残基以外のアミノ酸残基の記号を前記第 1 方向と交差する平行な第 2 方向に、前記第 1 方向に表示された前記各アミノ酸残基の記号の位置に対応させて、実空間に於いて前記各アミノ酸残基に近い、前記各アミノ酸残基以外のアミノ酸残基から順に、前記平行な第 2 方向に於いて単調増加関数に従って増加する位置に表示し、前記各アミノ酸残基の立体的環境を表示することを特徴とする蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法。

【請求項 2】請求項 1 に記載の蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法に於いて、前記単調増加関数が正の変数の 3 乗の定数倍であることを特徴とする蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法。

【請求項 3】請求項 1 に記載の蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法に於いて、前記各アミノ酸残基以外のアミノ酸残基を中心とする所定の内径と外径を持つ複数の球殻の各球殻に存在するアミノ酸残基の単位体積当たりの個数、又はアミノ酸残基の空間占有率を、前記球殻の前記内径又は前記外径の値が小から大となる順に前記平行な第 2 方向に表示することを特徴とする蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法。

【請求項 4】請求項 3 に記載の蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法に於いて、前記複数の球殻の各球殻に存在するアミノ酸残基の単位体積当たりの個数又はアミノ酸残基の空間占有率を濃淡表示、又は複数の色で表示することを特徴とする蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】遺伝子の機能の予測を支援するシステムに於ける表示方法、特に蛋白質のアミノ酸配列と立体構造情報の二次元的表示方法に関する。

【0002】

【従来の技術】遺伝病の診断、治療、ドラッグ・デザイン、生物の遺伝や代謝のメカニズムの解明等に活用する基本情報として、現在、ヒトを始めとする各種生物種の DNA の全塩基配列を決定するプロジェクトが進行中で、ヒトの DNA 全塩基配列の決定は、21 世紀初頭に終了する予定である。但し、DNA の塩基配列は、それだけで役に立つ情報ではなく、塩基配列で表現される遺伝子の機能を明らかにして初めて、諸々の分野に活用することが可能となる。既に、ヒトや全塩基配列の決定が終了した酵母の遺伝子の機能解析が始まっている。

【0003】遺伝子の機能を解析する手順としては、

(1) ある生物種の全塩基配列を決定する手順、(2)

全塩基配列上で蛋白質をコードする領域（遺伝子）を見出す手順、(3) 遺伝子の発現時に合成される蛋白質のアミノ酸配列と類似するアミノ酸配列を蛋白質データベース又は配列モチーフ・データベースから探し出す手順、(4) 互いに類似するアミノ酸配列の内、立体構造が既知の蛋白質に含まれるアミノ酸配列の立体構造を検討し、機能部位のアミノ酸配列が、機能し得る形態をとり、又は機能し得る位置にある否かを確認する手順、

(5) 合成された蛋白質と、染色体の領域、又は他の生体内蛋白質等との相互作用による効果（他の遺伝子の発現の促進・抑制、代謝系への影響）を明らかにする手順、(6) 遺伝子間の相互作用、遺伝子発現の代謝系への影響を総合し、生物のメカニズムの総体を明らかにする手順、が考えられる。

【0004】手順(4)に於いて、蛋白質の立体構造は、立体構造が実験的に知られていなくとも、遺伝子の塩基配列を翻訳することにより蛋白質のアミノ酸配列を得て、立体構造が既知である蛋白質のアミノ酸配列と比較することにより予測できる場合がある。

【0005】蛋白質の立体構造をアミノ酸配列から予測する方法としては、Levit のホモロジー・モデリングを用いる方法 (Levit, M., Accurate modeling of protein conformation by automatic segment matching. J Mol Biol 226, 507-533 (1992)) が挙げられる。予測又は決定された立体構造を、3次元グラフィックスで表示して、人間が眺めることにより、外部に露出したアミノ酸、即ち、蛋白質の表面に存在するアミノ酸がどれかがわかる。表面のアミノ酸だけが外部と相互作用し得るので、表面アミノ酸の機能は蛋白質の機能全体を決める重要な因子である。アミノ酸は、通常、アミノ酸配列となって初めてまとまった機能を示す。機能を有するアミノ酸配列を配列モチーフと呼ぶ。配列モチーフのデータベースとしては、PROSITE が挙げられる。

【0006】アミノ酸配列の外部への露出度及びアミノ酸配列の機能に関する情報を、蛋白質の機能解明のための支援情報として、人間に提供するためには、従来、立体構造の 3次元グラフィックス表示とアミノ酸配列表示の 2種類が必要であった。しかし、3次元グラフィックス表示は、立体の詳細な情報を提供する一方で、配列情報を表示するには向いていない。特に、蛋白質の内部に伸びるアミノ酸配列は見にくい。また、アミノ酸配列を端から順に読んでいく場合、途中で配列のルートを見失う可能性もある。

【0007】そこで、最近では、3次元グラフィックスとアミノ酸配列表示を並べて表示する遺伝子機能解析支援システムが現れている。このシステムでは、アミノ酸配列表示と 3次元グラフィックス表示の対応する部分を

3

同一の色で表示することにより、2種の表示を連携させている。しかし、2種の表示を見比べる作業は、煩雑であり、目や精神の疲労の原因にもなる。特に、3次元グラフィックスには、アミノ酸の露出度以外の情報も含まれるため、人間の注意力にも影響し、見落としを誘導する原因ともなる。そこで、アミノ酸配列の外部への露出度を、2次元的に表示して、アミノ酸配列と併記できることが望まれている。

【0008】

【発明が解決しようとする課題】本発明の目的は、遺伝子機能解析支援システムに於いて、システムのユーザが機能が未知である蛋白質の機能を推定するとき、従来技術よりも解析作業が容易にできる、蛋白質のアミノ酸配列情報及び蛋白質の立体構造情報を同時に表示する二次元的表示方法を提供することにある。

【0009】

【課題を解決するための手段】本発明の二次元的表示方法では、各アミノ酸残基を表わす記号の配列によりアミノ酸配列を表示し、アミノ酸配列の各アミノ酸残基の記号の近傍に該各アミノ酸残基の立体的環境に関する情報を表示する。立体的環境に関する情報は、例えば、Eisenbergらの3D-1D法に於ける三次元プロフィールでもよい。但し、この情報では、アミノ酸残基がどの程度蛋白質内部に埋もれているかという残基の極く近傍の情報しか与えられておらず、その蛋白質の表面が凸面なのか凹面なのかという蛋白質と他の物質との相互作用に於いて重要な情報を与えない。また、あるアミノ酸残基の近傍にある他のアミノ酸残基は、何個あって、各々、どの種のアミノ酸残基かという情報も与えない。

【0010】そこで、本発明の第1の構成では、第1方向に、アミノ酸配列の各アミノ酸残基の記号を表示し、第1方向に表示された各アミノ酸残基以外のアミノ酸残基の記号を第1方向と交差する第2方向に、第1方向に表示された各アミノ酸残基の記号の位置に対応させて、実空間に於いて各アミノ酸残基に近い、各アミノ酸残基以外のアミノ酸残基から順に、第2方向に於いて実空間距離の単調増加関数に従って増加する位置に表示し、各アミノ酸残基の立体的環境を表示する。

【0011】但し、第1の構成では、第2の方向に平行な直線に並ぶ他のアミノ酸残基の記号の込み具合（表示密度）は、必ずしも、実空間に於ける込み具合（密度）に比例するものとはなっておらず、蛋白質表面の凹凸等を表現できると限らない。そこで、本発明では、蛋白質表面の凹凸等の形状をも表示するために、単調増加関数を正の変数の3乗の定数倍とする。各アミノ酸残基からの一定距離の領域（球殻）に於けるアミノ酸残基の平均密度を、第2の方向に平行な直線上の他アミノ酸残基の記号の込み具合により表示するのは、記号同志の重なりが多い場合、適切ではない。本発明の第2の構成では、第1の構成に於いて、各アミノ酸残基以外のアミノ

4

酸残基を中心とする所定の内径と外径を持つ複数の球殻の各球殻に存在するアミノ酸残基の単位体積当たりの個数、又はアミノ酸残基の空間占有率を、球殻の内径又は外径の値が小から大となる順に上記の第2方向に表示することにより、各アミノ酸残基の立体的環境を表示する。アミノ酸残基の単位体積当たりの個数、又はアミノ酸残基の空間占有率は、数字で表現してもよいが見にくい。そこで、本発明では、各小球殻に於けるアミノ酸残基の単位体積当たりの個数、又はアミノ酸残基の空間占有率を濃淡表示するか複数の色で表示する。

【0012】

【発明の実施の形態】図1は、本発明の表示方法が適用される遺伝子機能解析支援システムの全体構成例を示す図である。蛋白質に関するデータを保存する記憶装置101には、蛋白質のアミノ酸配列、立体構造データが含まれる。記憶装置群102には、蛋白質のアミノ酸配列又は立体構造の元になるデータが含まれる。蛋白質のアミノ酸配列又は立体構造の元になるデータとしては、各種生物のゲノム及びcDNAの塩基配列、各種蛋白質の立体構造が挙げられる。必要であれば、配列の類似性を探索し、並置（アラインメント）するプログラム群、ゲノム塩基配列上の蛋白質のコード領域を予測するプログラム群、アミノ酸配列から立体構造を予測するためのプログラム群を保存してもよい。

【0013】デジタルコンピュータ103の一部の機能として、（1）記憶装置群102に記憶される予測プログラムを用いて、蛋白質データ101を補充する機能、（2）記憶装置101に記憶された蛋白質のアミノ酸配列データを検索して、類似するアミノ酸配列を見出し、類似するアミノ酸配列間のアラインメントの表示用データを作成する機能、（3）記憶装置101に記憶された蛋白質のアミノ酸配列データを検索して、立体構造が既知である蛋白質の立体構造及び各アミノ酸残基の立体的環境を表示するためのデータを作成する機能を有する。（1）から（3）の機能を遂行するために、デジタルコンピュータ103は、各機能を遂行するプログラムを搭載するか、又は、必要な機能を有するプログラムを記憶装置群102から複写し搭載する。デジタルコンピュータ103で作成された、立体構造が既知の蛋白質の立体構造及び各アミノ酸残基の立体的環境を表示するためのデータは表示装置104に表示される。デジタルコンピュータ103の機能を遂行するための入力データは、システムのユーザにより入力装置105から入力される。

【0014】図2は、従来技術でのアミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する例を示す図である。図2は、図1に示す遺伝子機能解析支援システムに於いて、互いに類似するアミノ酸配列（A、B、C）を見出し、配列中の類似性の高い領域と、アミノ酸配列Aを含み立体構造が既知の蛋白質の立体構造の一部とを表示し

た結果を模式的に示す。アミノ酸配列Aを含む蛋白質の立体構造をの一部を表示する表示領域201で、各楕円はアミノ酸残基を表わす。立体構造の表示法としては、スペース・フィル・モデル、ボール・アンド・スティック・モデル、二次構造をチューブ、リボン等で強調するモデル等が挙げられる。

【0015】立体構造が既知の蛋白質のアミノ酸配列の一部（アミノ酸配列A）202、アミノ酸配列Aと類似するアミノ酸配列B、C、203が、各々表示される。表示領域アミノ酸配列202、203は各矩形内に示すアミノ酸残基の種類を示す記号で表示される。図2に示す例では、記号 R_n 、 R'_n 、 R''_n ($n=-1, 0, \dots, 9$) が、アミノ酸残基の種類を示す記号の代わりに示されている。アミノ酸残基の種類を示す記号としては、3文字表記による記号 (Gly, Ala, Val, ...)、1文字コード (G, A, V, ...) 等が挙げられる。従来技術では図2の例に示すように、アミノ酸配列間のアミノ酸残基の対応関係は、アラインメントにより明らかであるが、アミノ酸配列と蛋白質の立体構造との関係は、各アミノ酸残基の記号を手掛かりに、表示201と表示202を比較する必要がある。

【0016】図3は、本発明に実施例に於ける、アミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する第1の例を示す図である。

【0017】アミノ酸配列のアラインメント302、303と共に、アミノ酸配列A、302の各アミノ酸残基の立体的環境のパラメータ（立体的環境パラメータ）301が表示される。参照番号301は、アミノ酸配列と並置して各アミノ酸残基の立体的環境のパラメータを用いて表示する領域である。アミノ酸配列A、302の各アミノ酸残基の記号 R_n の真上に、対応する立体的環境のパラメータ (E_n ; $n=-1, 0, \dots, 9$) 301が表示される。ここで、各 E_n は、立体的環境パラメータの代わりに示されている。立体的環境のパラメータとしては、Eisenbergらの3D-1D法で用いられるパラメータ (E, P1, P2, B1, B2, B3) が挙げられる。このパラメータは、各アミノ酸残基が、蛋白質内部に埋もれている表面積、及び極性アミノ酸残基に覆われている側鎖表面積の割合に基づいて決められる。

【0018】図3に示す第1の例の表示法によれば、アミノ酸配列302と対応する立体的環境パラメータ301が並置されているので、システムのユーザは、表示されているアミノ酸配列中の任意のアミノ酸残基に於ける立体的環境を容易に認識できる。また、立体的環境パラメータ301は、アミノ酸配列302、303と並置されているので、アミノ酸配列Aと類似するアミノ酸配列B、Cの立体的環境の検討や予測も容易である。しかし、パラメータ301による立体的環境の表示では、あるアミノ酸残基の近傍に存在する他のアミノ酸残基は、

何個あって、各々、どの種のアミノ酸残基かという情報を与えない。

【0019】図4は、本発明に実施例に於ける、アミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する第2の例を示す図である。図4には、図3と同様に、互いに類似するアミノ酸配列403、404が表示される。アミノ酸配列403、404は、図3と同様に、各矩形内に示すアミノ酸残基の種類を示す記号で表示される。アミノ酸配列A、403を含む立体構造が既知の蛋白質の各々のアミノ酸残基は、横に並ぶ矩形群402の各矩形により表わされている。402及び403に於いて、同一のアミノ酸残基を表現する矩形は対置されて表示されている。402中の各矩形によって表現されるアミノ酸残基の立体的環境は、該各矩形の真上に縦に並ぶ領域401内の各矩形群によって表現される。領域401の各矩形は、該各矩形の真下に表示される402中の矩形により表現されるアミノ酸残基以外のアミノ酸残基を表現する。参照番号401は、アミノ酸配列と並置して各アミノ酸残基の立体的環境を他のアミノ酸残基の記号に近いものから順に直線上に並べることにより表示する領域である。

【0020】領域401の各矩形は、該各矩形の真下の402中の矩形により表現されるアミノ酸残基と領域401内の各矩形により表現されるアミノ酸残基との実空間に於ける距離を R とする場合、該各矩形の真下の402中の矩形から $f(R)$ の距離に表示される。ここで、関数 $f(R)$ は、常に正の値をとり、変数 R に関して単調増加関数である。即ち、領域401内の各矩形により表現されるアミノ酸残基は、領域401内の該各矩形の真下の402中の矩形により表現されるアミノ酸残基に、実空間に於いて近いものから順に表示される。各矩形401に表示すべきアミノ酸残基の範囲は、 R の上限を設定することにより決めてもよい。

【0021】領域401内の任意の各矩形には、対応するアミノ酸残基の種類を表現する記号を表示してもよい。領域401内の各矩形が小さすぎて表示が困難な場合は、ユーザが領域401内の各矩形をマウス等の入力デバイスを用いて選択すると、アミノ酸残基の種類、物性等、アミノ酸残基に関する情報を表示するウィンドウを表示する仕組みを、システムに組み込んでよい。

【0022】図4に示す第2の例の表示法を採用することにより、システムのユーザは、配列403上の任意のアミノ酸残基の近傍に存在する他のアミノ酸残基は、何個あって、各々、どの種のアミノ酸残基かという情報を容易に知ることができる。また、図4の各アミノ酸の立体的環境を表示する領域401内の矩形群の縦方向（距離方向）での矩形の密度を比較することにより、アミノ酸配列403の任意のアミノ酸残基が、蛋白質の中に埋め込まれているのか、蛋白質の表面の近いところに位置しているのかという疑問に対する答えを、ある程度まで

得ることができる。但し、あくまで、アミノ酸配列403の他のアミノ酸残基との比較の上での相対的な答えである。アミノ酸配列403に於けるアミノ酸残基の立体的環境を表わす領域401内の矩形群の縦方向（距離方向）での矩形の密度が、実空間に於けるアミノ酸残基の単位体積当たりの数、即ち、濃度に比例するように表示すれば、あるアミノ酸残基からの距離に依存する立体的環境（他のアミノ酸残基の濃度）の変化を、領域401内の矩形群の縦方向（距離方向）での矩形の密度の距離依存性を通して、ユーザに認識させることが出来る。

【0023】図5は、本発明の実施例に於ける、距離と容積の関係を説明する図である。図5に示すように、あるアミノ酸残基から距離Rよりも近い領域の体積は R^3 に比例する。従って、図4に示す領域401内の各矩形の表示に用いる関数 $f(R)$ を R^3 に比例する関数とすれば、Rの増加に伴う表示領域の増分は実空間に於ける球の体積の増分に比例するので、アミノ酸配列403に於けるアミノ酸残基の立体的環境を表わす領域401内の矩形群の縦方向（距離方向）での矩形の密度は、アミノ酸残基の濃度に比例することになる。

【0024】図6は、本発明の実施例に於ける、種々の位置に於ける蛋白質の空間占有率を説明する図である。図6を用いて、あるアミノ酸からの距離に依存するアミノ酸残基の濃度を知ることにより得られる情報の一例を示す。斜線部601は、ある蛋白質の断面形状を示し、アミノ酸残基群（蛋白質）により実空間が占有されていることを示す。円602、603、604は一個のアミノ酸残基を示しており、アミノ酸残基602は蛋白質の凸の表面、アミノ酸残基603は蛋白質の凹の表面に位置し、アミノ酸残基604は蛋白質の内部に埋め込まれている。図6から明らかなように、凸表面に位置するアミノ酸残基602の近傍に於ける他のアミノ酸残基による空間占有率は50%以上であり、凹表面に位置するアミノ酸残基603の近傍に於ける他のアミノ酸残基による空間占有率は50%以下であり、蛋白質内部に埋め込まれたアミノ酸残基604の近傍に於ける他のアミノ酸残基による空間占有率は100%であることがわかる。更に、表面に位置するアミノ酸残基からの距離による空間占有率が、距離の増大と共に増大している場合には、そのアミノ酸残基は蛋白質の表面にあるものの、蛋白質内の洞窟状の空洞内に位置していることを意味する。このように、あるアミノ酸残基から距離に依存するアミノ酸残基による空間占有率を知ることにより、蛋白質の表面形状を詳しく知ることができる。アミノ酸残基による空間占有率は、アミノ酸残基の濃度にほぼ比例するから、アミノ酸残基の濃度からも蛋白質の表面形状情報を詳しく知ることができる。

【0025】図4に於いて、 R^3 に比例する $f(R)$ を採用して領域401内の各矩形を表示する場合でも、アミノ酸残基を表現する記号（矩形）が込みすぎて、アミ

ノ酸残基の濃度又は空間占有率の変化を認識しにくくなる場合があり得る。このような場合、以下に説明する図7に示す第3の例の表示を採用することが好ましい。

【0026】図7は、本発明の実施例に於ける、アミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する第3の例を示す図である。図7に於いて、参照番号703、704は、図4に於ける参照番号403と404に対応し、類似配列のアラインメントを表わしている。

【0027】参照番号702は、アミノ酸配列と並置して各アミノ酸残基の立体的環境を、アミノ酸残基を中心とする球殻内の他のアミノ酸の空間占有率により表示する領域を示す。領域702は、アミノ酸配列A、703の各アミノ酸残基を中心とする球殻毎に、他のアミノ酸残基による空間占有率、又は他のアミノ酸残基の濃度を表示したものである。球殻は、互いに接しているが、重なり合わない。領域702では、径の小さな球殻に関する情報から、径の大きな球殻に関する情報へと、順に表示されている。縦軸701には、領域702に示す各矩形の下の辺と上の辺の高さの位置に、対応する球殻の内径と外径（ R_0 と R_1 、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 、 R_4 と R_5 ）が表示される。領域702の各矩形の内部に、アミノ酸配列703の一つの与えられたアミノ酸残基を中心とする一つの与えられた球殻に於ける他のアミノ酸残基による空間占有率、又は他のアミノ酸残基の濃度（ F_n 、 s ； $n=-1, 0, \dots, 9$ ； $s=1, 2, \dots, 5$ ）が表示されている。アミノ酸配列703の各アミノ酸残基を中心とする F_n 、 s の表示は、アミノ酸配列703の真上の領域702の各矩形に表示されている。

【0028】図7に示す第3の例の表示法を採用することにより、アミノ酸配列703の任意のアミノ酸残基からの距離に依存する他のアミノ酸残基による空間占有率、又は他のアミノ酸残基の濃度の変化を調べることが容易となる。 F_n 、 s の表示は数値による表示でも、濃淡表示でも、複数カラーによる段階表示でもよい。これらの表示形式を交互に切り換え可能とすることにより、より解析を容易とすることもできる。

【0029】また、図4、及び図7に示す表示法の切り換えを可能とすることにより、類似するアミノ酸配列のアラインメントと比較しながら、蛋白質表面の形状の解析及びアミノ酸残基単位の立体環境を解析することが従来よりも容易となる。

【0030】

【発明の効果】本発明の表示方法に用いれば、遺伝子機能解析支援システム等に於いて、類似するアミノ酸配列のアラインメントと比較しながら、蛋白質表面の形状の解析及びアミノ酸残基単位の立体環境を解析することが従来よりも容易となる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の表示方法が適用される遺伝子機能解析

支援システムの全体構成例を示す図。

【図2】従来技術でのアミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する例を示す図。

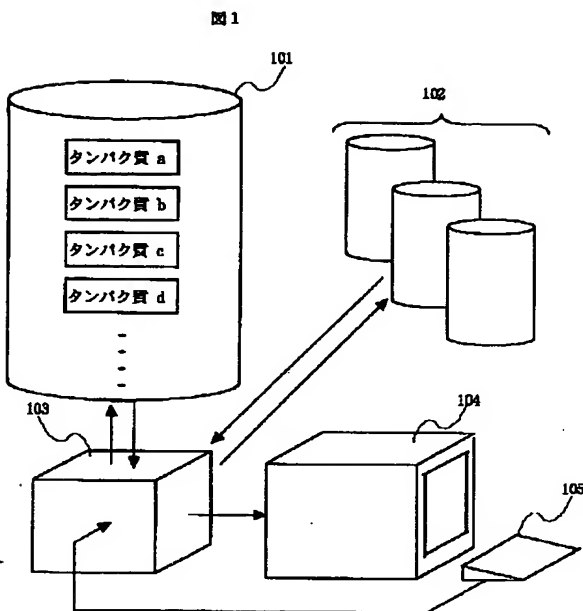
【図3】本発明の実施例に於ける、アミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する第1の例を示す図。

【図4】本発明の実施例に於ける、アミノ酸配列と関係する立体構造情報を同時に表示する第2の例を示す図。

【図5】本発明の実施例に於ける、距離と容積の関係を説明する図。

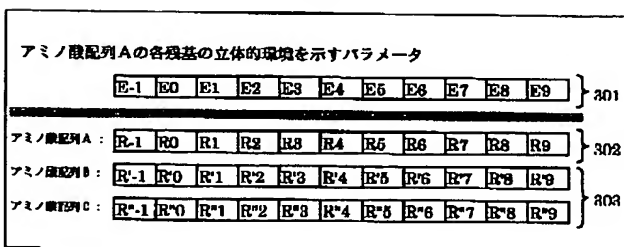
【図6】本発明の実施例に於ける、種々の位置に於ける蛋白質の空間占有率を説明する図。

【図1】



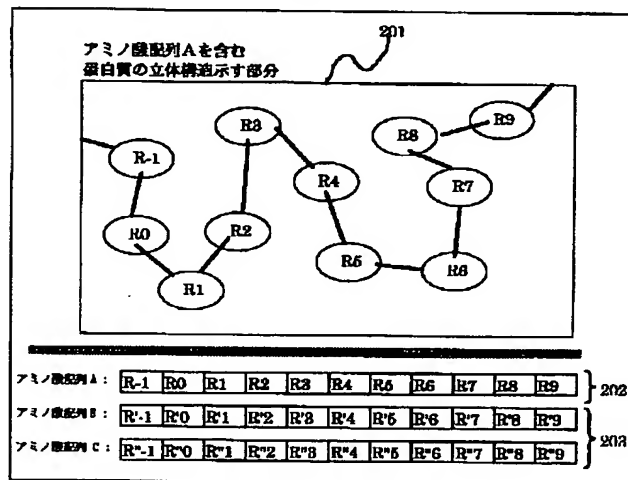
【図3】

図3



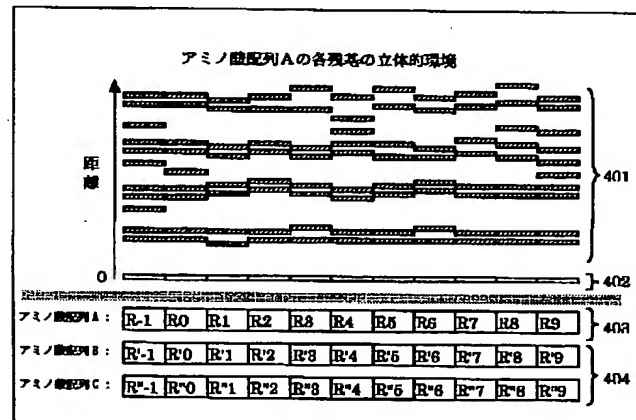
【図2】

図2

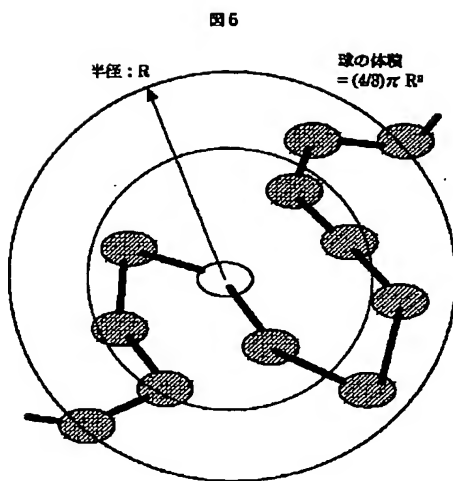


【図4】

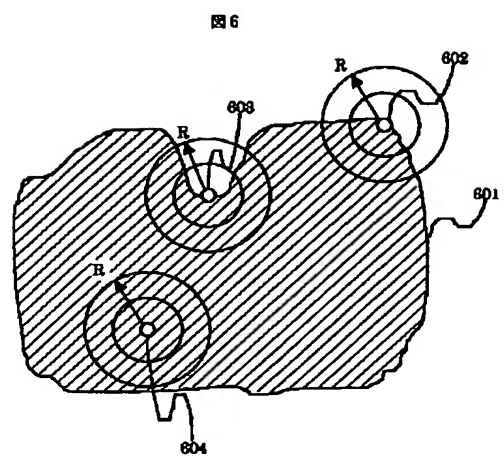
図4



【図 5】



【図 6】



【図 7】

図 7

301 アミノ酸配列 A の各残基の立体的環境

R ₀	F _{1,5}	F _{0,5}	F _{1,5}	F _{2,5}	F _{3,5}	F _{4,5}	F _{5,5}	F _{6,5}	F _{7,5}	F _{8,5}	F _{9,5}
R ₄	F _{1,4}	F _{0,4}	F _{1,4}	F _{2,4}	F _{3,4}	F _{4,4}	F _{5,4}	F _{6,4}	F _{7,4}	F _{8,4}	F _{9,4}
R ₃	F _{1,3}	F _{0,3}	F _{1,3}	F _{2,3}	F _{3,3}	F _{4,3}	F _{5,3}	F _{6,3}	F _{7,3}	F _{8,3}	F _{9,3}
R ₂	F _{1,2}	F _{0,2}	F _{1,2}	F _{2,2}	F _{3,2}	F _{4,2}	F _{5,2}	F _{6,2}	F _{7,2}	F _{8,2}	F _{9,2}
R ₁	F _{1,1}	F _{0,1}	F _{1,1}	F _{2,1}	F _{3,1}	F _{4,1}	F _{5,1}	F _{6,1}	F _{7,1}	F _{8,1}	F _{9,1}
R ₀	F _{1,0}	F _{0,0}	F _{1,0}	F _{2,0}	F _{3,0}	F _{4,0}	F _{5,0}	F _{6,0}	F _{7,0}	F _{8,0}	F _{9,0}

702

アミノ酸配列 A: R-1 R-0 R-1 R-2 R-3 R-4 R-5 R-6 R-7 R-8 R-9 } 703

アミノ酸配列 B: R'-1 R'-0 R'-1 R'-2 R'-3 R'-4 R'-5 R'-6 R'-7 R'-8 R'-9 } 704

アミノ酸配列 C: R*-1 R*-0 R*-1 R*-2 R*-3 R*-4 R*-5 R*-6 R*-7 R*-8 R*-9 }